

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲 第 号	氏 名	松島 直輝
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授	博士(理学) 山内 淳
	副査	慶應義塾大学教授	理学博士 江藤 幹雄
		慶應義塾大学教授	理学博士 佐々田 博之
		慶應義塾大学教授	工学博士 藪下 聡
(論文審査の要旨) 学士(理学)、修士(理学) 松島直輝君提出の学位請求論文は、「立方晶炭化珪素中の不純物格子欠陥における XPS 束縛エネルギーの第一原理的研究」と題し、全6章から構成されている。 炭化珪素(SiC)はパワーデバイスとしての応用が期待されるワイドギャップ半導体である。素子として動作させるためには不純物元素をドーピングして p 型、n 型領域を作成する必要がある。これらのドーパント原子の挙動を調べる上で最も基本的な情報は原子構造であるが、バルク内部の欠陥構造を調べることは一般に難しく、いくつかの観測手段の結果を比較する必要があり、理論的な解析が必須である。本論文では観測手段としてX線光電子分光(XPS)に着目し、立方晶 SiC 中におけるドーパント原子を含む格子欠陥について、一般化勾配近似汎関数 PBE96 を用いた第一原理計算法により、XPS 束縛エネルギーならびに形成エネルギーを導出している。p 型元素としてホウ素、アルミニウム、n 型として窒素、燐を取り扱っている。計算結果を用いて XPS 束縛エネルギーと格子欠陥構造の関係について解析している。更に、形成エネルギー計算から安定な欠陥種を同定し、将来観測されると期待される XPS ピークについて予測している。 第1章では、序論として、人工化合物である SiC の歴史、合成方法、不純物ドーピングについて紹介した後、XPS の測定ならびに計算法について説明し、本論文の目的、構成について述べている。 第2章では、電子状態計算について説明し、Hartree-Fock 法、密度汎関数法、混成汎関数法の基礎について述べた後、全エネルギーの表式、擬ポテンシャルについて触れ、本論文で議論される形成エネルギー、XPS 束縛エネルギーの定義と計算法について述べている。 第3章では、密度汎関数法の計算条件ならびに格子欠陥モデルについて説明した後、数値的精度を確認するためのテスト計算結果についてまとめている。その中では、著者自身により実装されたバンドギャップ再現性の高い混成汎関数 HSE06 を用いて、バンドギャップ上部に状態を持つことが多い n 型欠陥について、PBE96 が十分な精度を示すことも確認している。 第4章では、n、p 型それぞれの欠陥について XPS 束縛エネルギーの計算結果について述べ、この束縛エネルギーを局所ポテンシャル項と緩和エネルギー項に分けて欠陥構造との関係を解析している。局所ポテンシャルについては、格子欠陥の原子構造から直感的に類推される静電ポテンシャルの寄与が大きい、緩和エネルギーではそのような解釈が難しい。その原因は、光電子放出前後に欠陥原子近傍に局在する軌道が緩和エネルギーに大きな影響を与えるためであることを明らかにしている。この局在軌道は、伝導帯と価電子帯の間のバンドギャップだけではなく、価電子帯内部、並びに価電子帯下部のエネルギーギャップ領域に存在する場合があることを指摘している。 第5章では、前章で調べた欠陥について、熱平衡状態での安定性を決定する形成エネルギーの計算結果をまとめ、形成エネルギーが低い欠陥の形成確率が高くなることから、実験的に観測される可能性の高い XPS ピークについて予測している。 第6章では、本論文の結果についてまとめている。 以上、本論文の著者は、SiC 中の不純物原子による XPS 束縛エネルギーと格子欠陥構造の関係、観測スペクトル予測について新しい知見を提供している。緩和エネルギーと局在軌道の関係は SiC に限らず、広く半導体一般に成立する知見である。このため、この研究成果は、半導体分野の発展に貢献し、理学分野へ寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士(理学)の学位を受ける資格があるものと認める。			
学識確認結果	学位請求論文を中心にして関連学術について上記審査会委員で試問を行い、当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。 また、語学（英語）についても十分な学力を有することを確認した。		